Minería de datos y Patrones

Version 2024-1

PCA
Principal Component Analysis

[Capítulo 3]

Dr. José Ramón Iglesias
DSP-ASIC BUILDER GROUP
Director Semillero TRIAC
Ingenieria Electronica
Universidad Popular del Cesar

Repaso

Valores Propios: λ_l

$\mathbf{C}$: Matriz de $L \times L$

$$|\mathbf{C} - \lambda_l \mathbf{I}| = 0$$

λ_l : valores propios de $\mathbf{C}$

$l = 1, 2, \cdots L$

$$\{\lambda_l\} = e_{val}(\mathbf{C})$$

Ejemplo:

calcular valores propios de $\mathbf{C} = \left[\begin{array}{cc} 4 & 3 \\ 1 & 2 \end{array} \right]$

$$|\mathbf{C} - \lambda_l \mathbf{I}| = 0$$

$$|\mathbf{C} - \lambda \mathbf{I}| = \left| \begin{array}{cc} 4-\lambda & 3 \\ 1 & 2-\lambda \end{array} \right| = (4-\lambda)(2-\lambda) - 3$$

$$\lambda^2 - 6\lambda + 5 = 0 \qquad \lambda_1 = 5, \lambda_2 = 1.$$

Vectores Propios: $\mathbf{v}_l$

$\mathbf{C}\mathbf{v}_l = \lambda_l \mathbf{v}_l$ $\quad$ $\mathbf{v}_l$: vectores propios de $L \times 1$

Como hay infinitas soluciones: s.t. $||\mathbf{v}_l|| = 1$

$\{\mathbf{v}_l\}$ son vectores ortonormales:

$$\mathbf{v}_l^{\mathsf{T}} \mathbf{v}_k = \begin{cases} 1 & \text{si } l = k \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

$$\{\mathbf{v}_l\} = e_{vec}(\mathbf{C})$$

Matriz de Vectores Propios: $\mathbf{A}$

$\mathbf{A} = [\mathbf{v}_1 \ \ \mathbf{v}_2 \ \ \cdots \ \ \mathbf{v}_L]$: Matriz de $L \times L$

$$\mathbf{A} = e_{mat}(\mathbf{C})$$

Propiedades:

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathsf{T}} = \mathbf{I} \longleftarrow \mathbf{v}_l^{\mathsf{T}}\mathbf{v}_k = \begin{cases} 1 & \text{si } l = k \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

$$\mathbf{C}\mathbf{A} = [\lambda_1\mathbf{v}_1 \ \ \lambda_2\mathbf{v}_2 \ \ \cdots \ \ \lambda_L\mathbf{v}_L] \longleftarrow \mathbf{C}\mathbf{v}_l = \lambda_l\mathbf{v}_l$$

Transformaciones Lineales

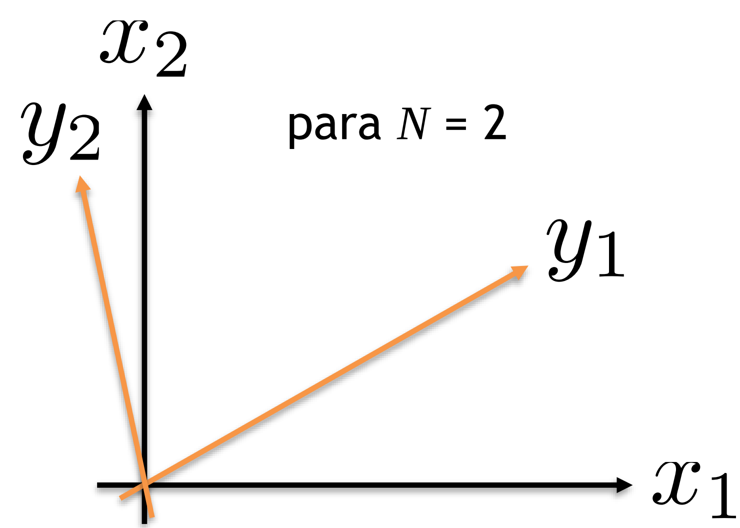
$$y_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1N}x_N$$

$$y_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2N}x_N$$

$$\vdots$$

$$y_N = a_{N1}x_1 + a_{N2}x_2 + \cdots + a_{NN}x_N$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$$



- Ángulo entre y_1 e y_2 no necesariamente es 90^0
- En esta transformación el origen coincide
- Si se necesita desplazar origen es necesario agregar $+a_{i0}$ a la fila i

Promedio y Varianza:

$$\mathbf{x} = \left[x_1 \ x_2 \ \cdots x_N\right]^{\mathsf{T}} \quad \text{de } N \times 1$$

(promedio) $$\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$$

(varianza) $$\sigma_x^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(\bar{x} - x_i)^2$$

Covarianza:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_L \end{bmatrix} \quad \text{de} \quad N \times L$$

$$\mathbf{M}_x = \underbrace{\underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}}_{N \text{ unos}} \underbrace{\begin{bmatrix} \bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \cdots & \bar{x}_L \end{bmatrix}}_{\bar{\mathbf{x}} \quad \text{promedio de cada columna de } \mathbf{X}}}_{\text{Matriz de } N \times L \text{: cada columna tiene el promedio de la columna correspondiente de } \mathbf{X}.}$$

Matriz de $N \times L$: cada columna tiene el promedio de la columna correspondiente de $\mathbf{X}$.

Covarianza:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_L \end{bmatrix}$$ de $N \times L$

$$\mathbf{M}_x = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \cdots & \bar{x}_L \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}_0 = \mathbf{X} - \mathbf{M}_x$$ cada columna de $\mathbf{X}_0$ tiene media cero

$$\mathbf{C}_x = \frac{1}{N-1} \mathbf{X}_0^\top \mathbf{X}_0 = \mathrm{cov}(\mathbf{X})$$

Covarianza:

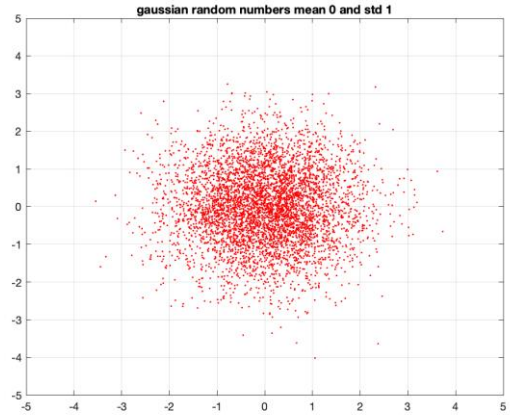
$$C_x(l,l) = \sigma^2_{x_l}$$

$$C_x(l,k) = \text{ Covarianza de } \mathbf{x}_l \text{ con } \mathbf{x}_k = \mathrm{cov}(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l)$$

> 0 correlación positiva
= 0 no hay correlación
< 0 correlación negativa

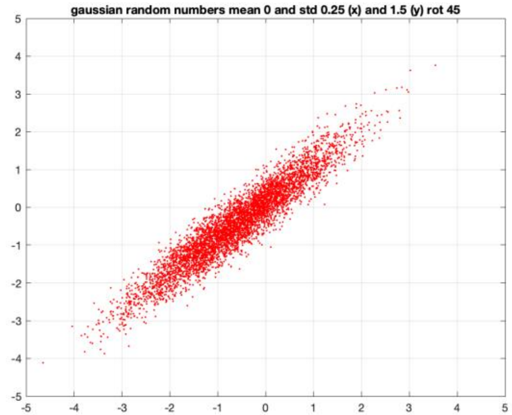
$$\mathbf{C}_x = \frac{1}{N-1}\mathbf{X}_0^{\mathsf{T}}\mathbf{X}_0 = \mathrm{cov}(\mathbf{X})$$

Ejemplo: Matrices de Covarianza



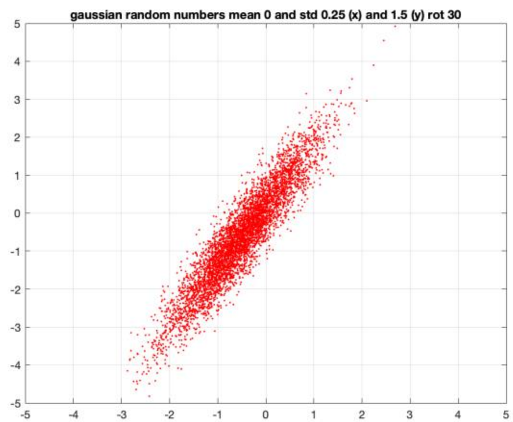

```
c =

    0.9735    0.0041
    0.0041    1.0105
```




```
c =

    1.1465    1.0891
    1.0891    1.1604
```

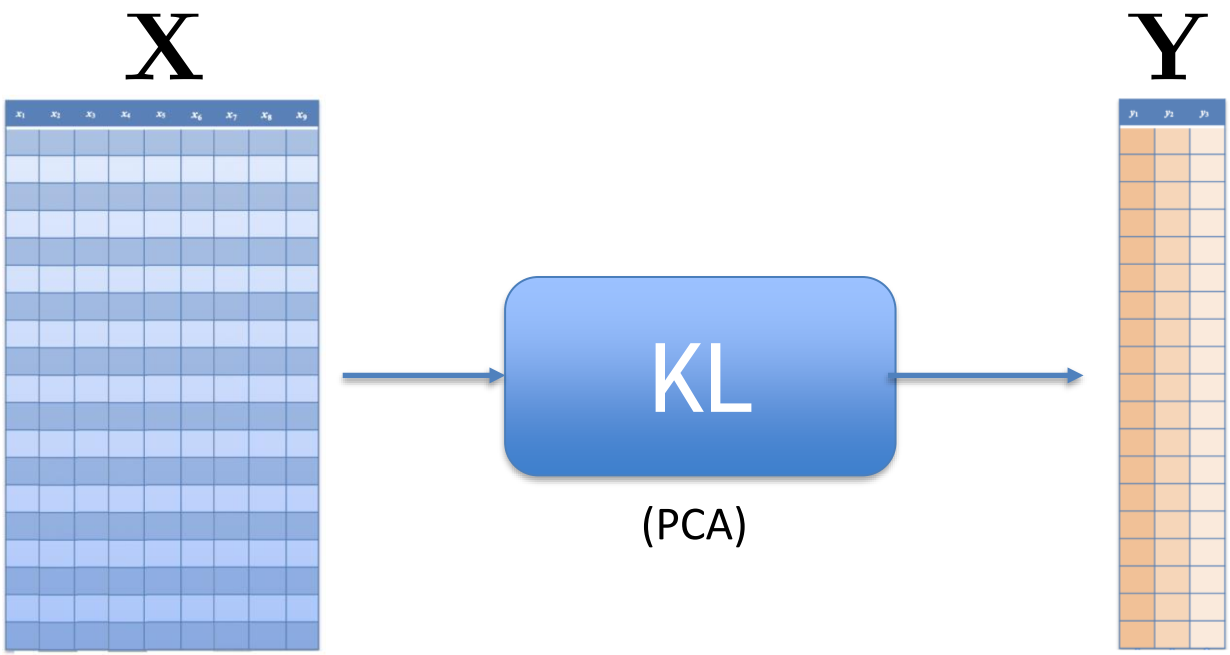



```
c =

    0.6013    0.9290
    0.9290    1.6678
```

TRANSFORMACIÓN KARHUNEN-LOEVE (PCA) (1947)

La Transformada de Karhunen-Loeve (KL) es conocida como PCA (Principal Component Analysys). La idea es transformar los datos originales $\mathbf{X}$ en datos nuevos $\mathbf{Y}$ que no tengan correlación entre ellos.



$$\operatorname{cov}(y_k, y_l) = 0$$

Transformación KL:

$$\mathbf{X} = \left[\mathbf{x}_1 \;\; \mathbf{x}_2 \;\; \cdots \;\; \mathbf{x}_L\right] \quad \text{de} \quad N \times L$$

$$\mathbf{X}_0 = \mathbf{X} - \mathbf{M}_x$$

$$\mathbf{C}_x = \frac{1}{N-1}\mathbf{X}_0^{\mathsf{T}}\mathbf{X}_0 = \mathrm{cov}(\mathbf{X})$$

$$\mathbf{A} = e_{mat}(\mathbf{C}_x)$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}_0\mathbf{A} \quad \leftarrow \text{Transformación KL de } \mathbf{X}$$

$$\mathbf{X} = \mathbf{Y}\mathbf{A}^{\mathsf{T}} + \mathbf{M}_x \quad \leftarrow \text{Transformación KL inversa de } \mathbf{Y}$$

($\mathbf{A}$ es ortonormal)

Interpretación de KL:

Covarianza de $\mathbf{Y}$:

$$\mathbf{C}_y = \frac{1}{N-1}\mathbf{Y}_0^\top \mathbf{Y}_0 = \mathrm{cov}(\mathbf{Y})$$

$$\mathbf{Y}_0 = \mathbf{Y} - \cancel{\mathbf{M}_y}$$

Como $\mathbf{Y} = \mathbf{X}_0\mathbf{A}$ y la media de las columnas de $\mathbf{X}_0$ es cero, entonces $\mathbf{M}_y = \mathbf{0}$

$$\mathbf{Y}_0 = \mathbf{Y}$$

$$\mathbf{C}_y = \frac{1}{N-1}\mathbf{Y}^\top \mathbf{Y} = \mathrm{cov}(\mathbf{Y})$$

Interpretación de KL:

Covarianza de $\mathbf{Y}$:

$$\mathbf{C}_y \equiv \frac{1}{N-1}\mathbf{Y}^\top \mathbf{Y} = \mathrm{cov}(\mathbf{Y})$$

$$= \frac{1}{N-1}(\mathbf{X}_0\mathbf{A})^\top \mathbf{X}_0\mathbf{A}$$

$$= \frac{1}{N-1}\mathbf{A}^\top \mathbf{X}_0^\top \mathbf{X}_0\mathbf{A}$$

$$= \mathbf{A}^\top \mathbf{C}_x \mathbf{A}$$

Interpretación de KL:

Covarianza de $\mathbf{Y}$:

como $\mathbf{A} = e_{mat}(\mathbf{C}_x)$ entonces

$$\mathbf{A} = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \cdots \ \mathbf{v}_L]$$

$$\mathbf{C}_x\mathbf{A} = [\lambda_1\mathbf{v}_1 \ \lambda_2\mathbf{v}_2 \ \cdots \ \lambda_L\mathbf{v}_L]$$

$$\mathbf{C}_y = \mathbf{A}^{\mathsf{T}}\mathbf{C}_x\mathbf{A}$$

$$\mathbf{C}_y = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \cdots \ \mathbf{v}_L]^{\mathsf{T}}[\lambda_1\mathbf{v}_1 \ \lambda_2\mathbf{v}_2 \ \cdots \ \lambda_L\mathbf{v}_L]$$

Interpretación de KL:

Covarianza de $\mathbf{Y}$:

$$\mathbf{C}_y = \begin{bmatrix} \lambda_1 \mathbf{v}_1^\top \mathbf{v}_1 & \cancel{\lambda_2 \mathbf{v}_1^\top \mathbf{v}_2} & \cdots & \cancel{\lambda_L \mathbf{v}_1^\top \mathbf{v}_L} \\ \cancel{\lambda_1 \mathbf{v}_2^\top \mathbf{v}_1} & \lambda_2 \mathbf{v}_2^\top \mathbf{v}_2 & \cdots & \cancel{\lambda_L \mathbf{v}_2^\top \mathbf{v}_L} \\ & \vdots & & \\ \cancel{\lambda_1 \mathbf{v}_L^\top \mathbf{v}_1} & \cancel{\lambda_2 \mathbf{v}_L^\top \mathbf{v}_2} & \cdots & \lambda_L \mathbf{v}_L^\top \mathbf{v}_L \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{C}_y = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \cdots \ \mathbf{v}_L]^\top [\lambda_1 \mathbf{v}_1 \ \lambda_2 \mathbf{v}_2 \ \cdots \ \lambda_L \mathbf{v}_L]$$

Interpretación de KL:

Covarianza de $\mathbf{Y}$:

$$\mathbf{C}_y = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \cdots \ \mathbf{v}_L]^{\mathsf{T}}[\lambda_1\mathbf{v}_1 \ \lambda_2\mathbf{v}_2 \ \cdots \ \lambda_L\mathbf{v}_L]$$

$$\mathbf{C}_y = \begin{bmatrix} \lambda_1 \mathbf{v}_1^{\mathsf{T}}\mathbf{v}_1 \ {=1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 \mathbf{v}_2^{\mathsf{T}}\mathbf{v}_2 \ {=1} & \cdots & 0 \\ & \vdots & & \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_L \mathbf{v}_L^{\mathsf{T}}\mathbf{v}_L \ {=1} \end{bmatrix}$$

Interpretación de KL:

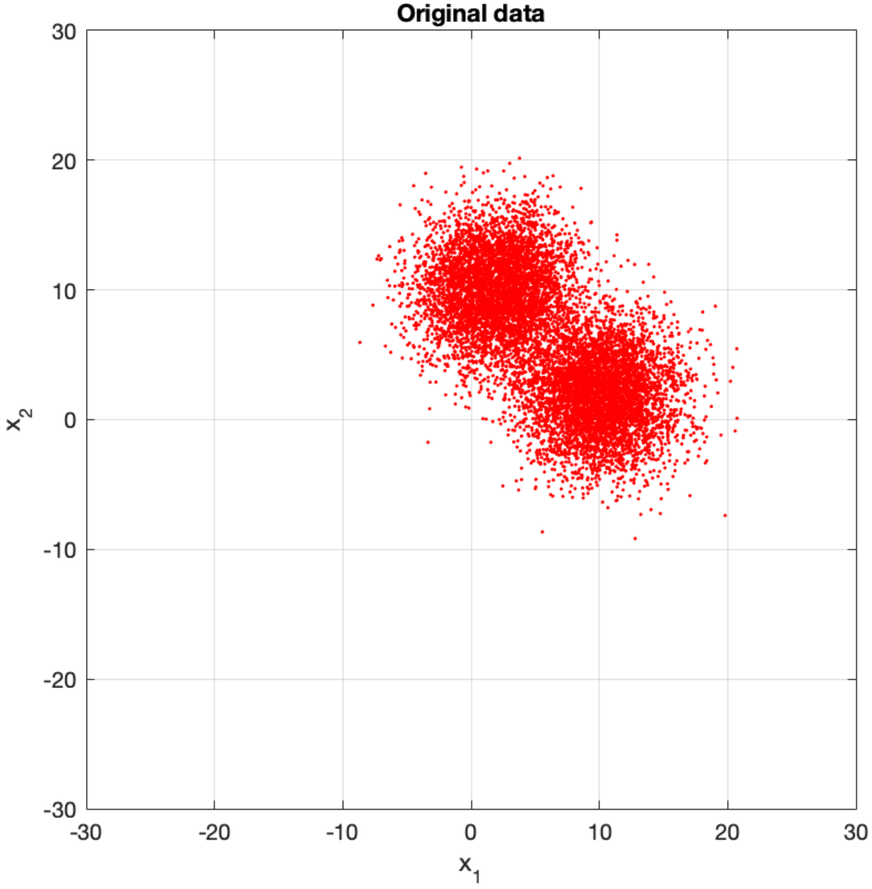
Covarianza de $\mathbf{Y}$:

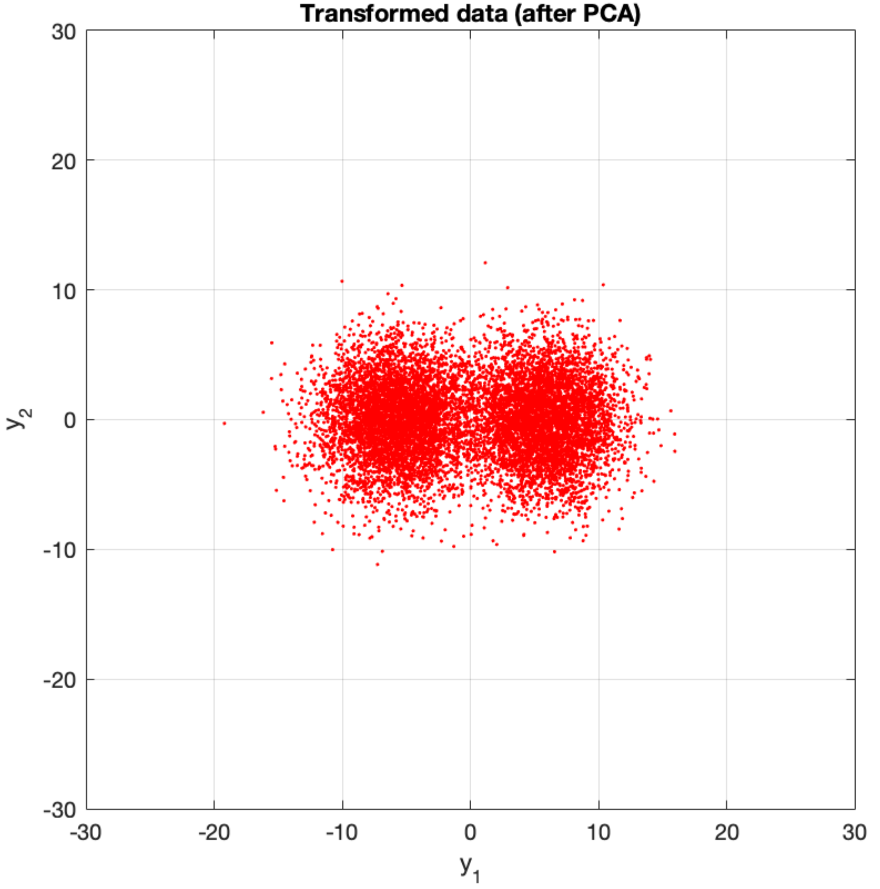
$$\mathbf{C}_y = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ & \vdots & & \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_L \end{bmatrix}$$

Generalmente, se ordena de tal forma que: $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_L$

SIGNIFICADO

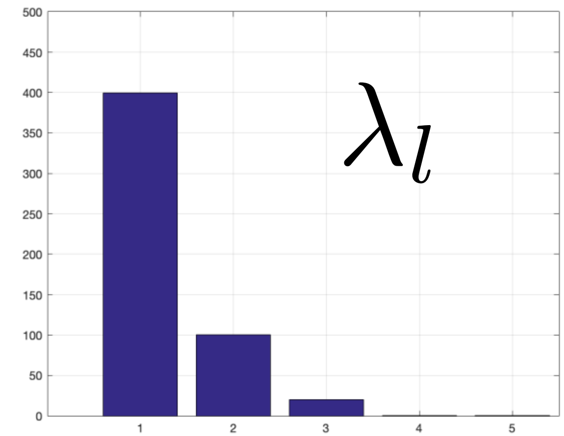
Ejemplo en 2D



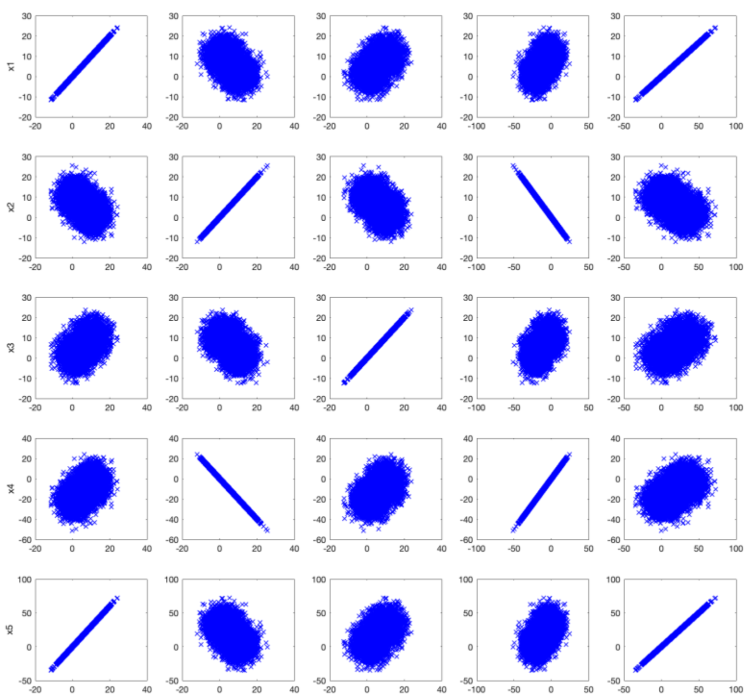


Ejemplo en 5D

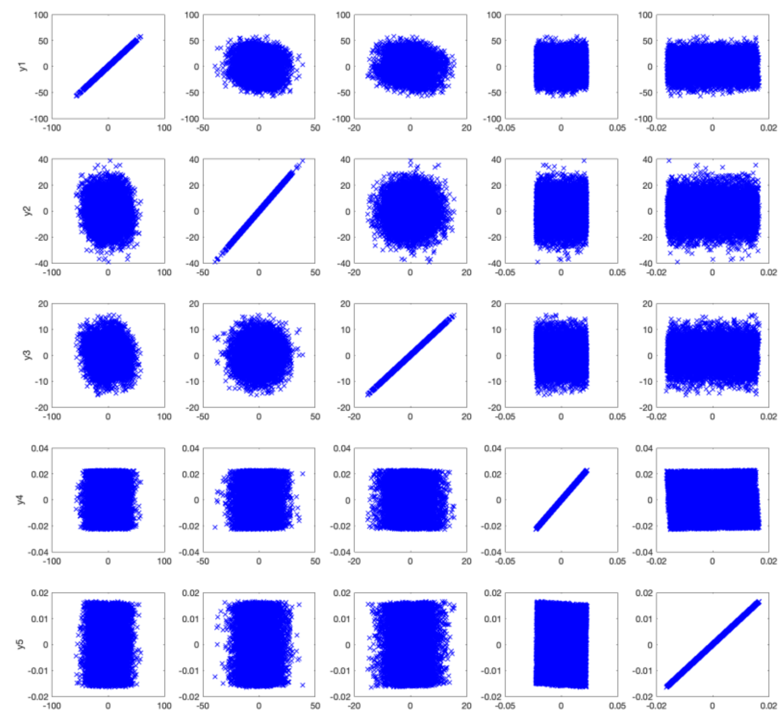
$\mathbf{X}$



$\mathbf{X}$

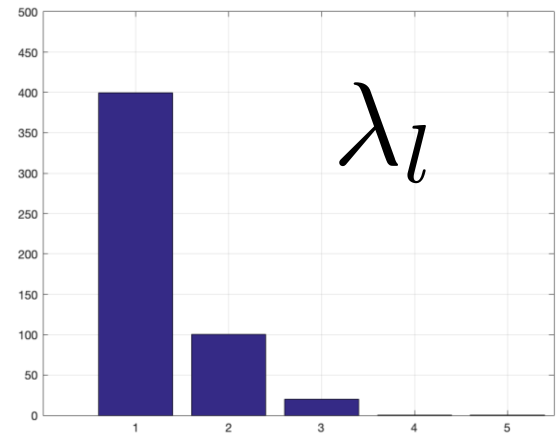


$\mathbf{Y}$

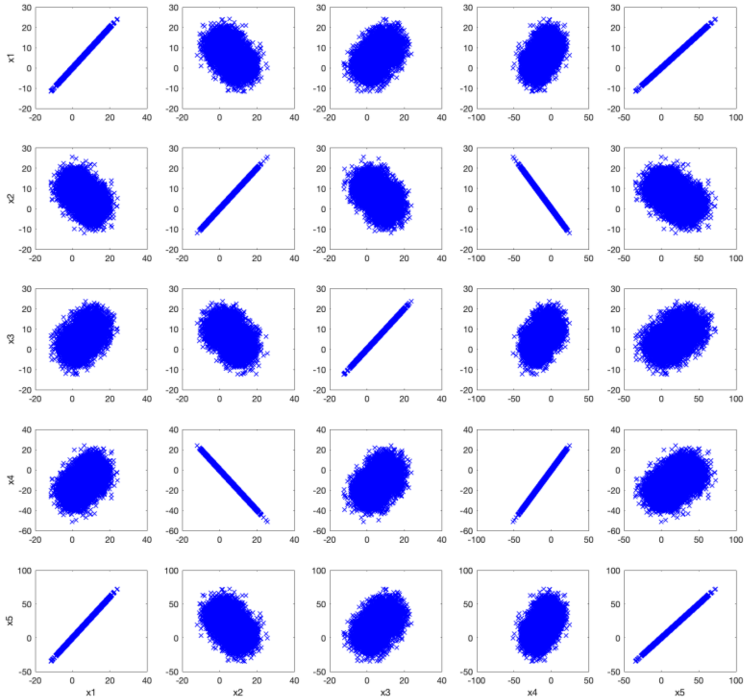


Ejemplo en 5D

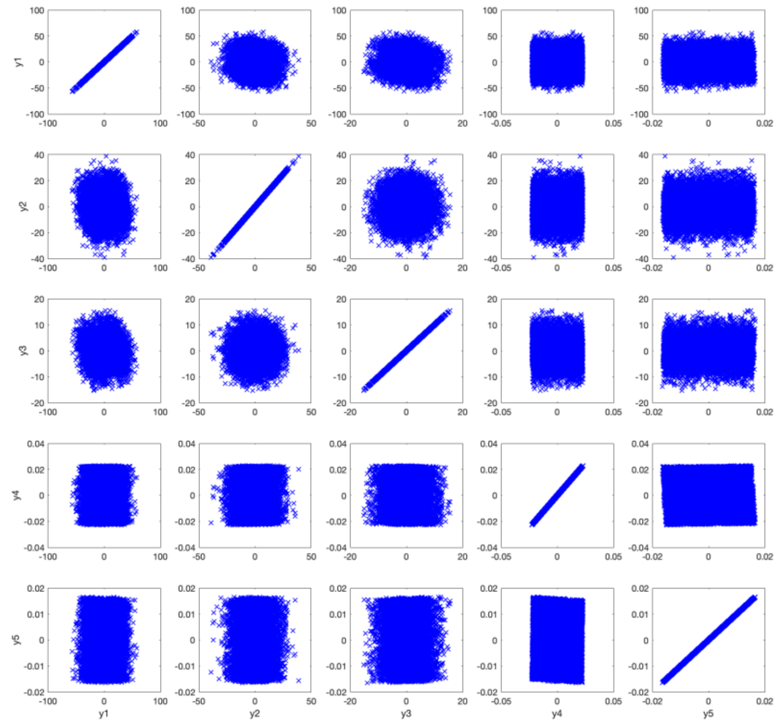
$\mathbf{Y}$



$\mathbf{X}$

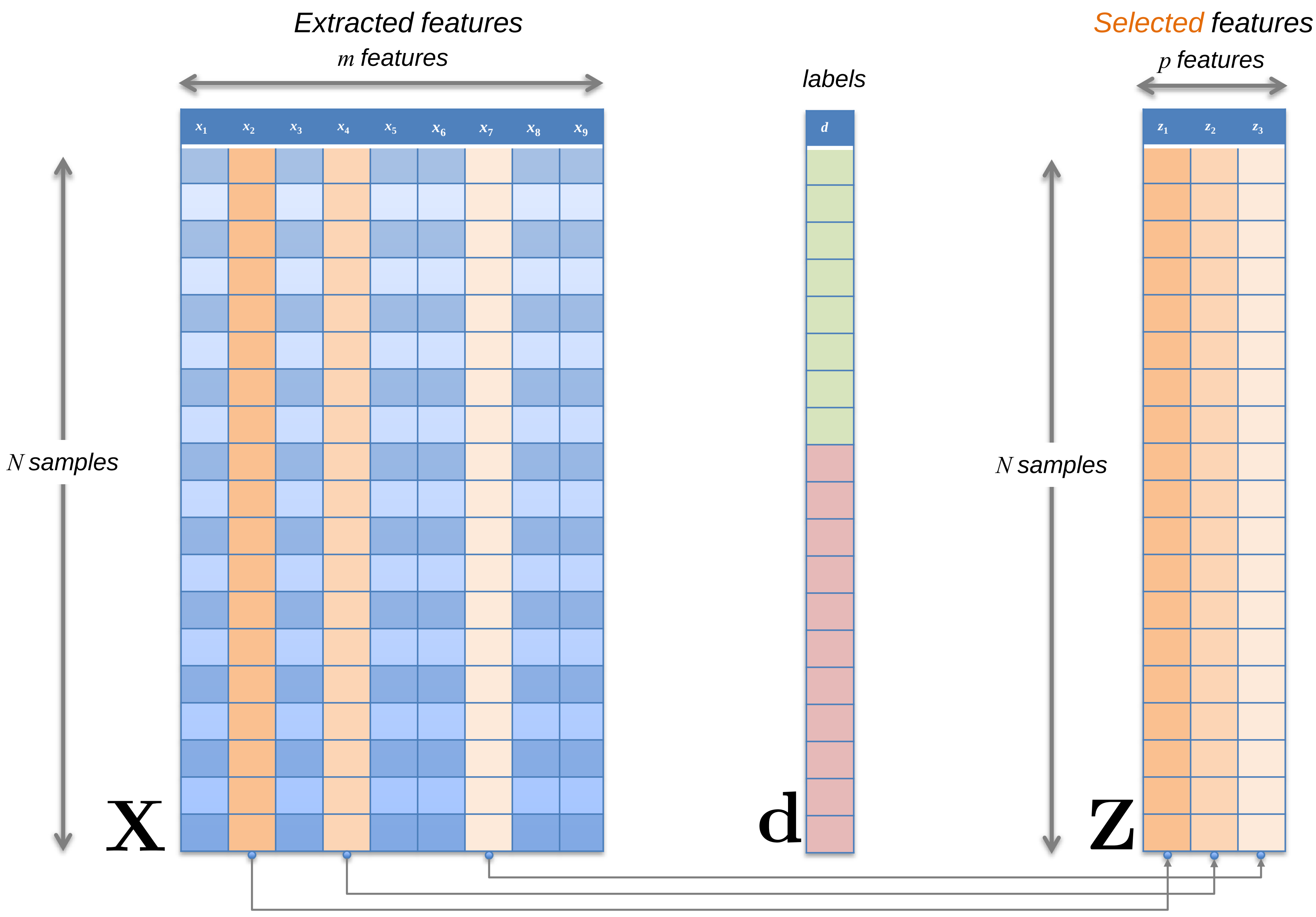


$\mathbf{Y}$

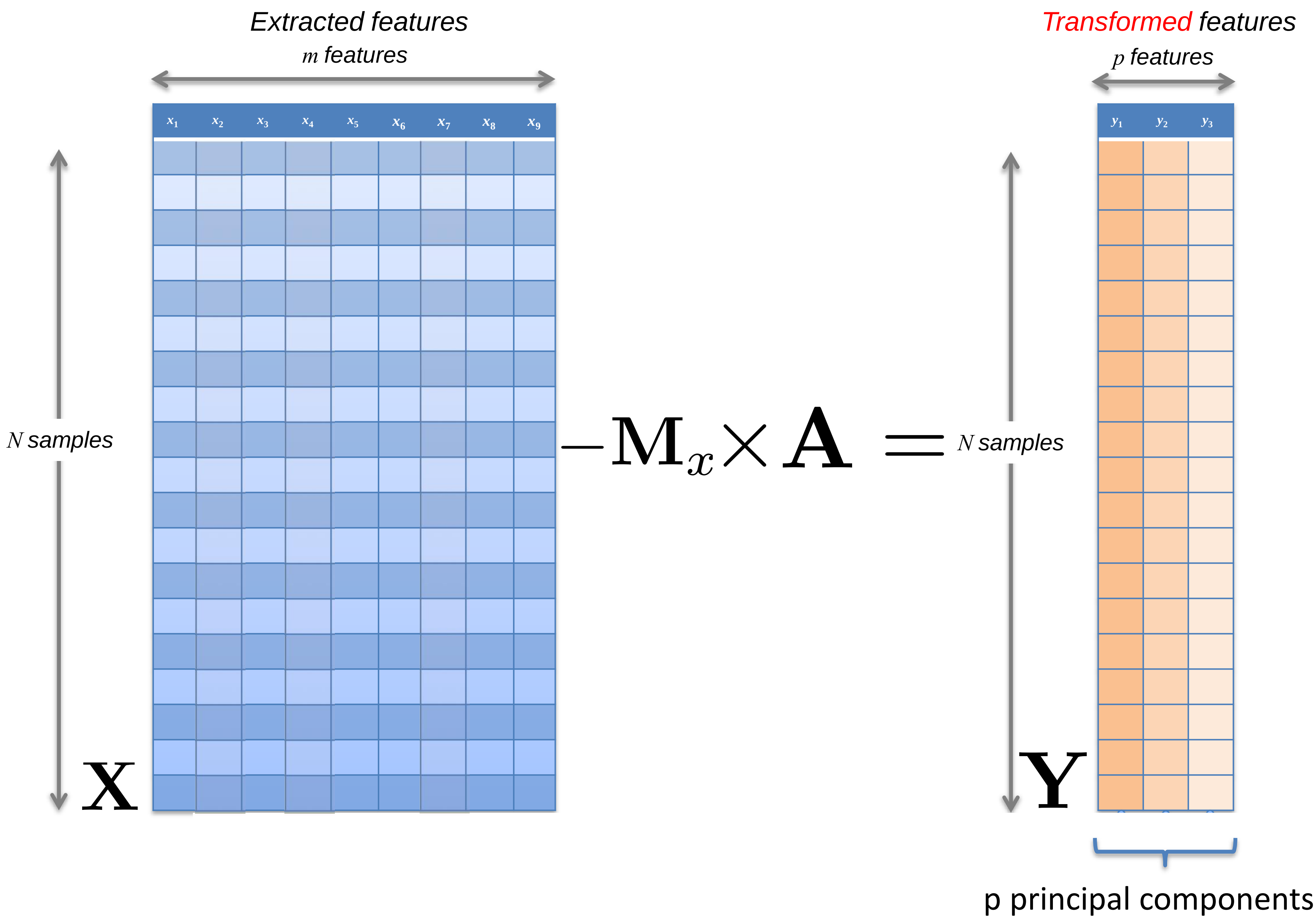


SIGNIFICADO
EN LA TRANSFORMACIÓN DE
CARACTERÍSTICAS

SELECCION DE CARACTERISTICAS



PCA


Extracted features
m features
x_1 x_2 x_3 x_4 x_5 x_6 x_7 x_8 x_9
N samples
$\mathbf{X}$
$-\mathbf{M}_x \times \mathbf{A} =$
Transformed features
p features
y_1 y_2 y_3
N samples
$\mathbf{Y}$
p principal components

Significado de PCA:

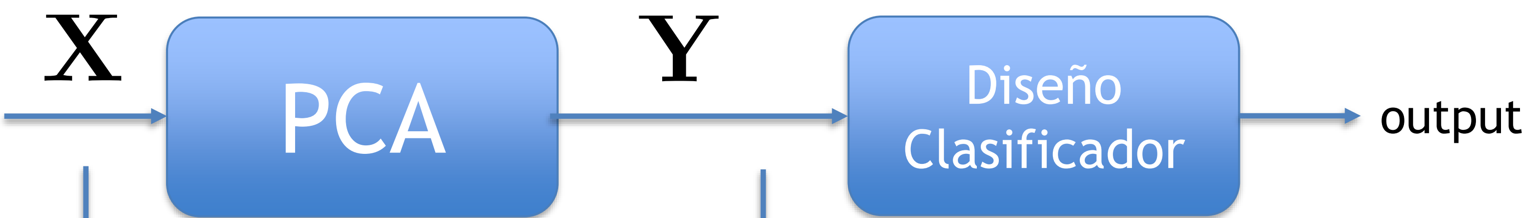
1. $\mathbf{Y}$ es una nueva representación de $\mathbf{X}$ (es una transformación lineal de $\mathbf{X}$)

2. Las columnas de $\mathbf{Y}$ no tienen correlación: $C_y(k,l) = 0$ para $k \neq l$

3. Ordenado de mayor a menor las columnas de $\mathbf{Y}$ están ordenadas por importancia

APLICACIÓN A RECONOCIMIENTO DE PATRONES

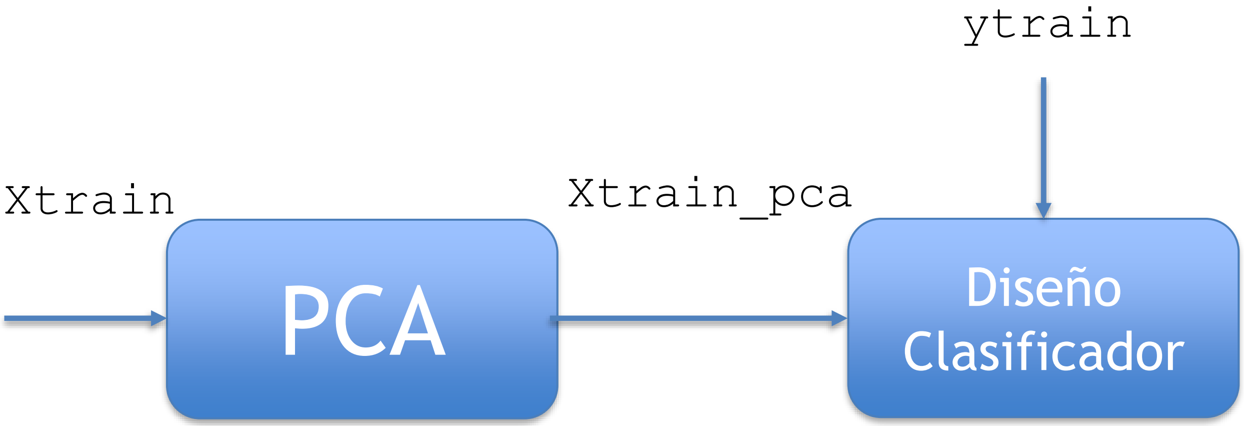
Estrategia con PCA:



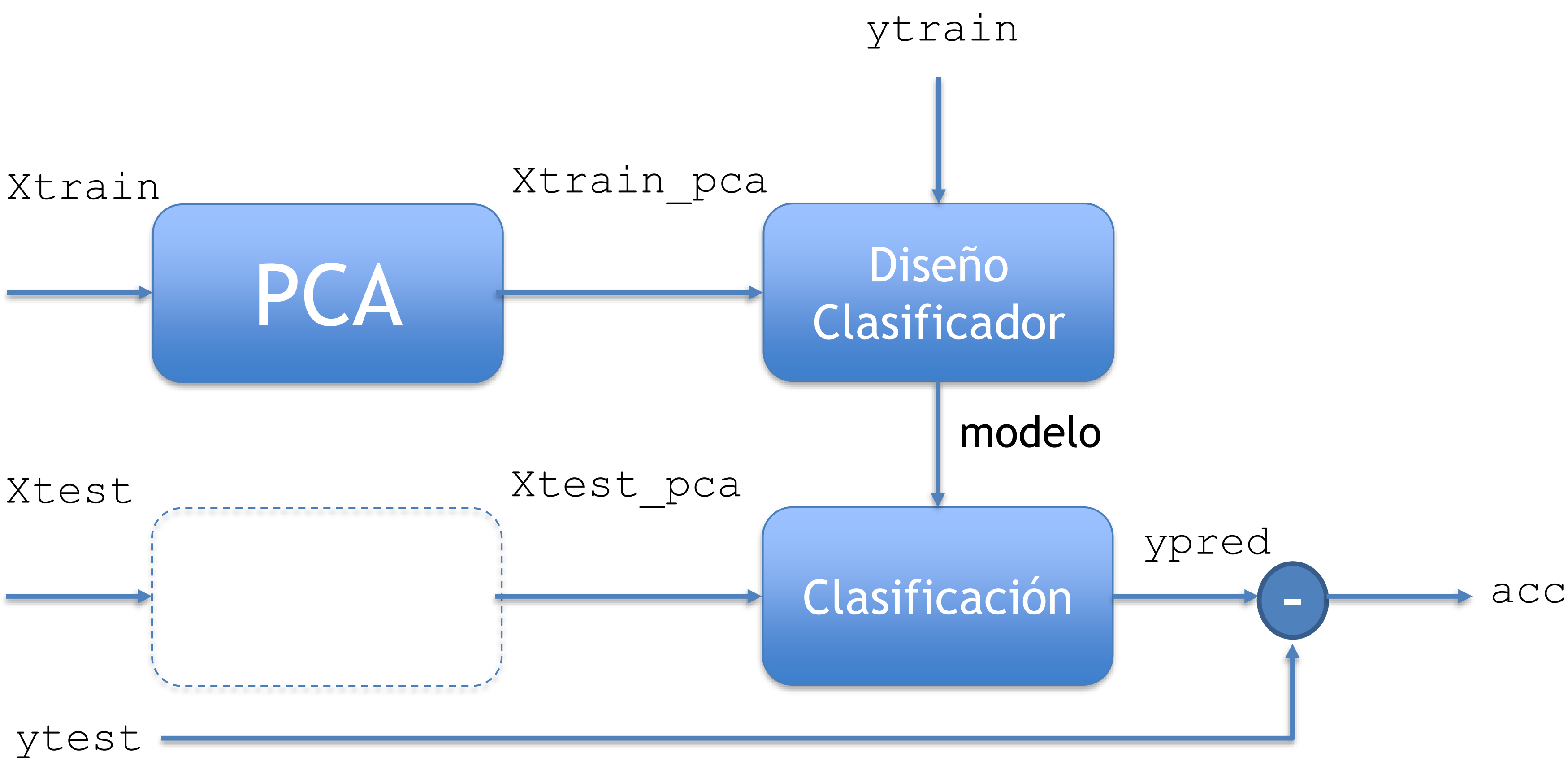
Características extraídas N x L
(N muestras y L características)

Nuevas características N x L
(N muestras y L nuevas características)
Se escogen las p primeras (las componentes principales)

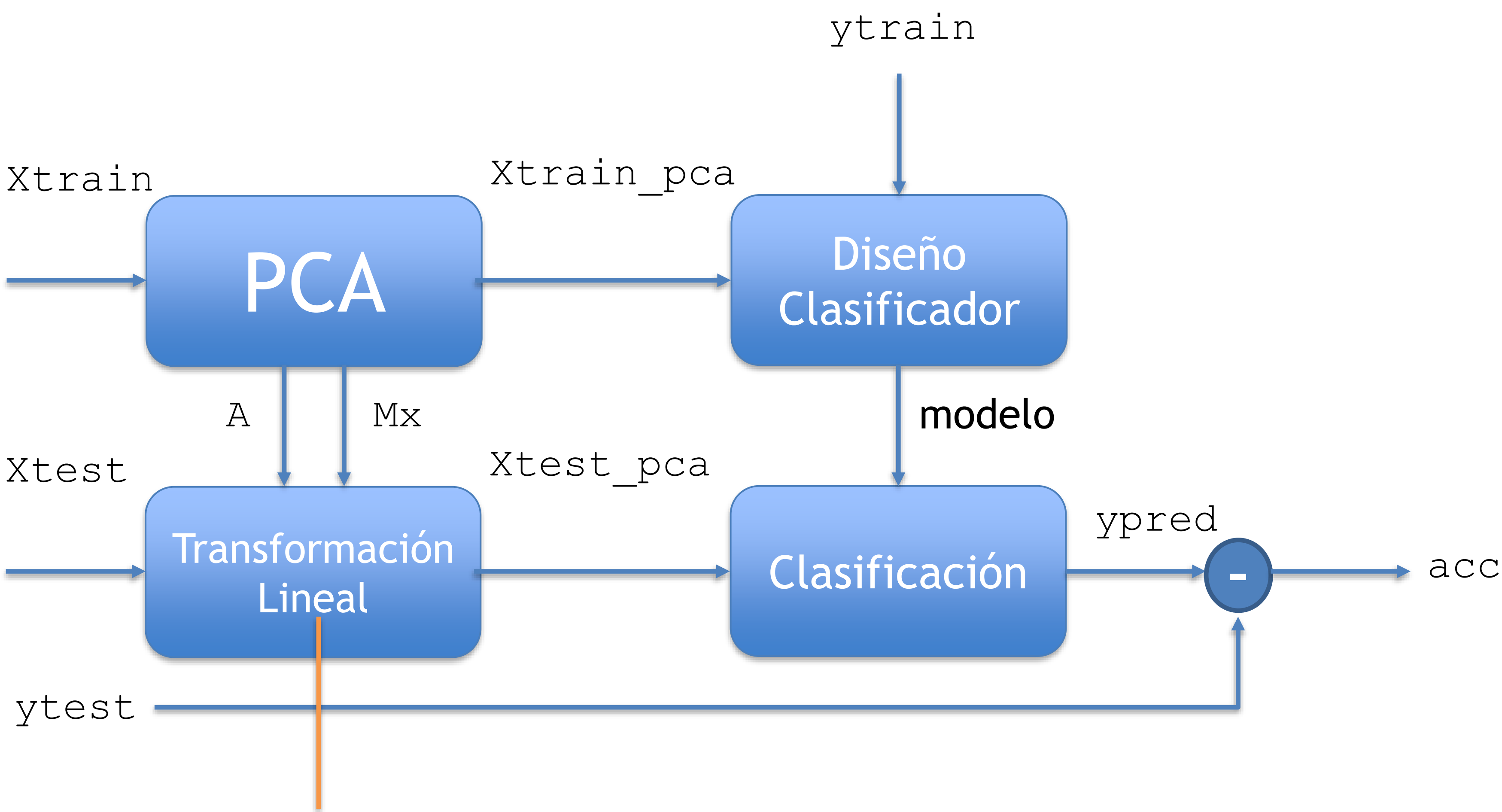
Training



Training / Testing



Training / Testing



$$Xtest\_pca = (Xtest - Mx) \times A$$

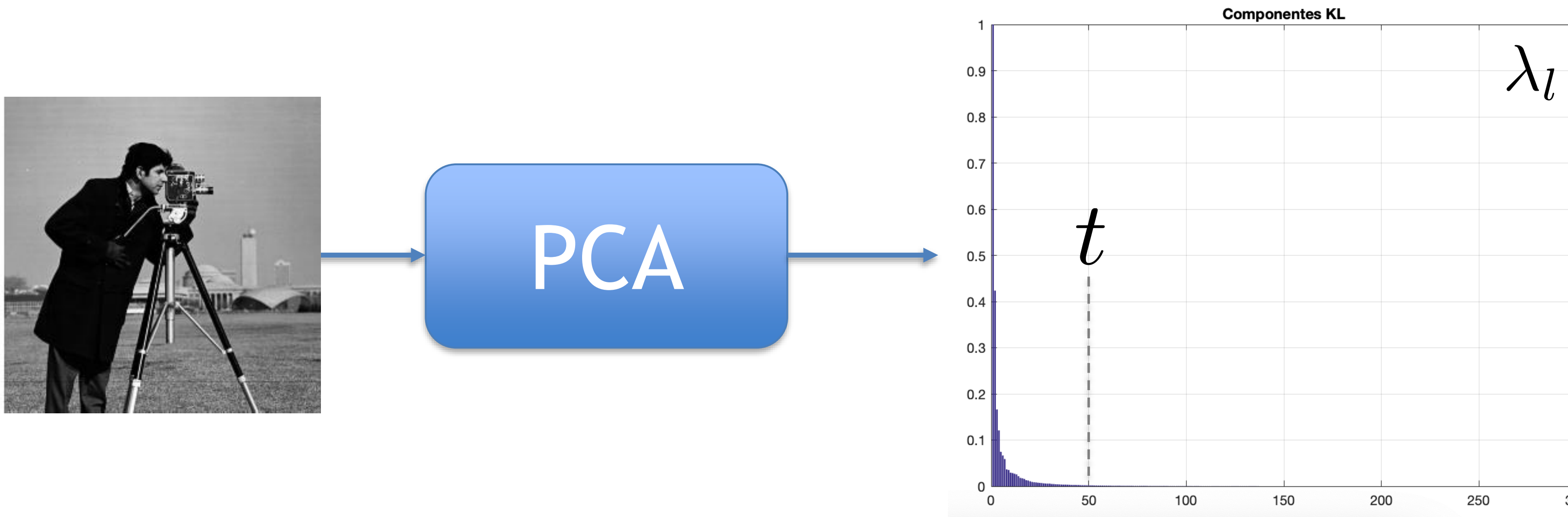
Ventajas de PCA:

1. La representación de muchas características es mucho más sencilla ya que se reduce la dimensionalidad

2. La clasificación usando las primeras componentes es más simple y más rápida para el clasificador

3. Es posible reconstruir $\mathbf{X}$ a partir de las principales columnas de $\mathbf{Y}$. $\mathbf{X} = \mathbf{Y}\mathbf{A}^{\mathsf{T}} + \mathbf{M}_x$

Reconstrucción con PCA:



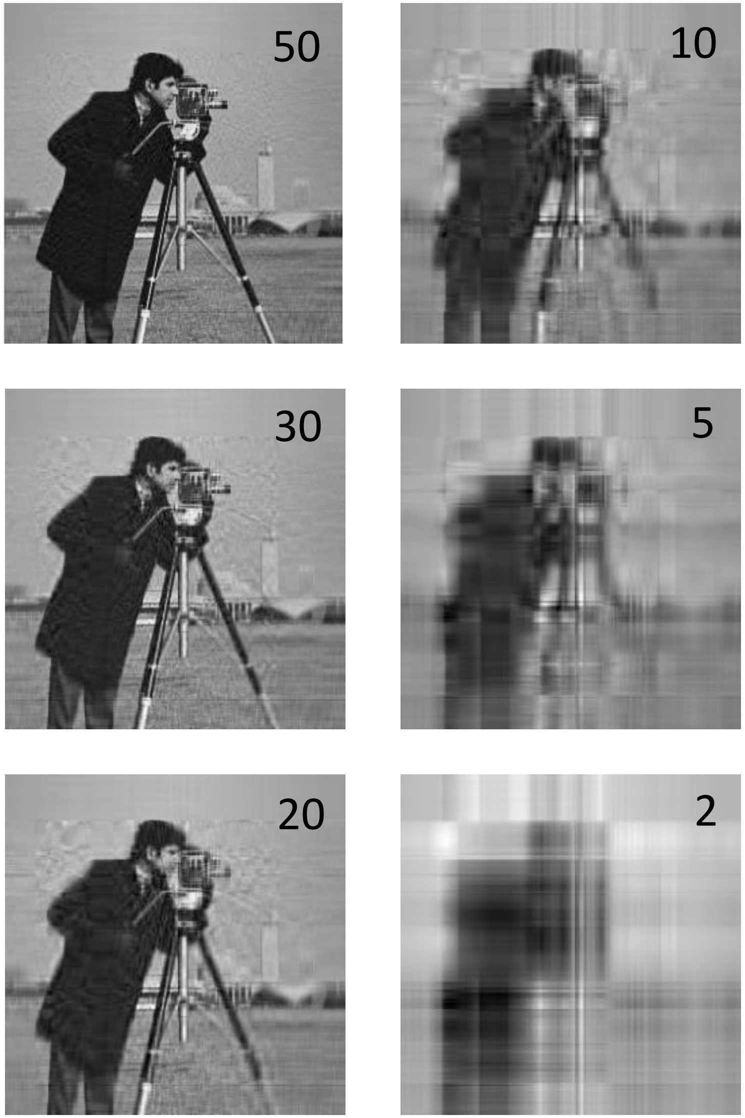
$$\mathbf{A}_t \leftarrow \text{primeras } t \text{ columnas de } \mathbf{A}$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}_0 \mathbf{A}_t \leftarrow \text{primeras } t \text{ componentes principales de } \mathbf{X}$$

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{Y}\mathbf{A}_t^{\mathsf{T}} + \mathbf{M}_x \leftarrow \text{reconstrucción de } \mathbf{X}$$

Reconstrucción con PCA:

t	Error
256	0.00%
200	0.08
100	0.94%
50	2.05%
30	2.93%
20	3.67%
10	5.36%
5	6.98%
2	9.10%



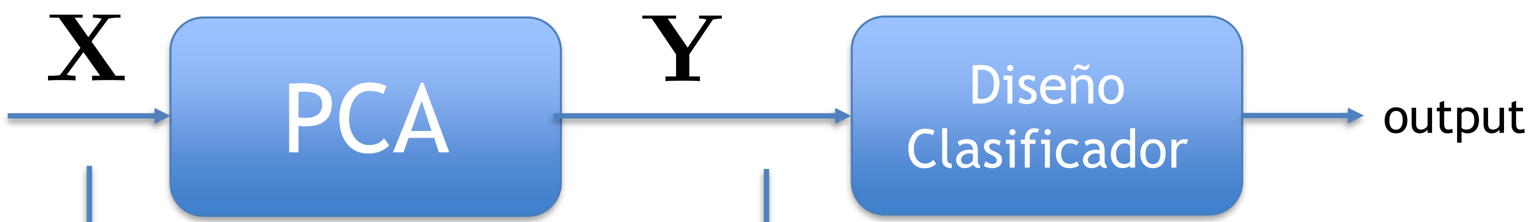
Desventajas de PCA:

1. Las características de PCA dependen de todas las características extraídas (es necesario extraer todas las características $\mathbf{X}$ para obtener $\mathbf{Y}$, no hay ahorro de cómputo en la extracción)

2. PCA al no incluir información de los *labels* no asegura que las características transformadas tengan una buena separabilidad.

ALTERNATIVAS

Estrategia con PCA (original):

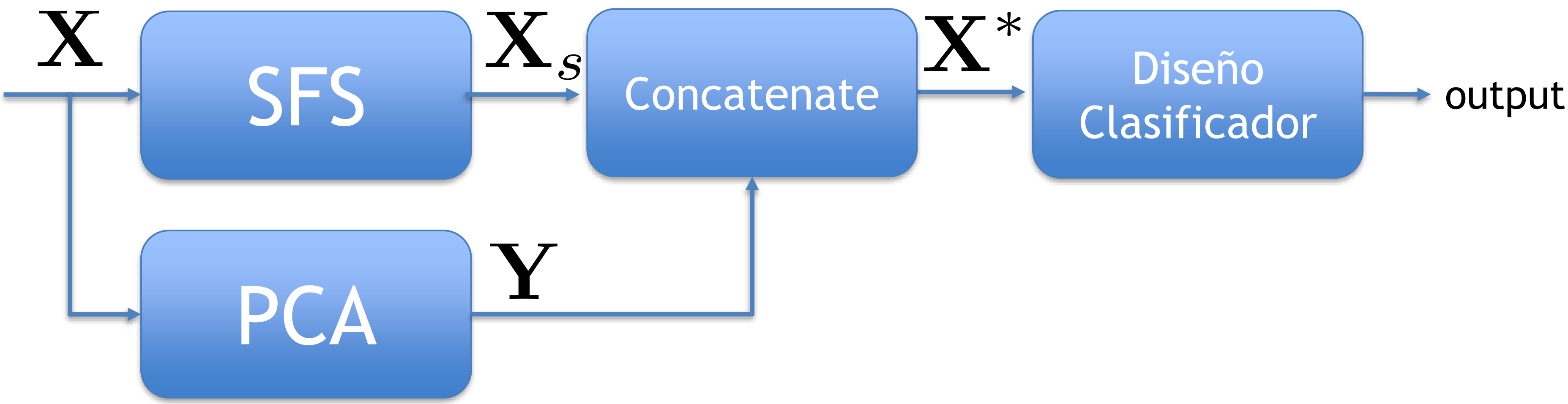


Características extraídas N x L
(N muestras y L características)

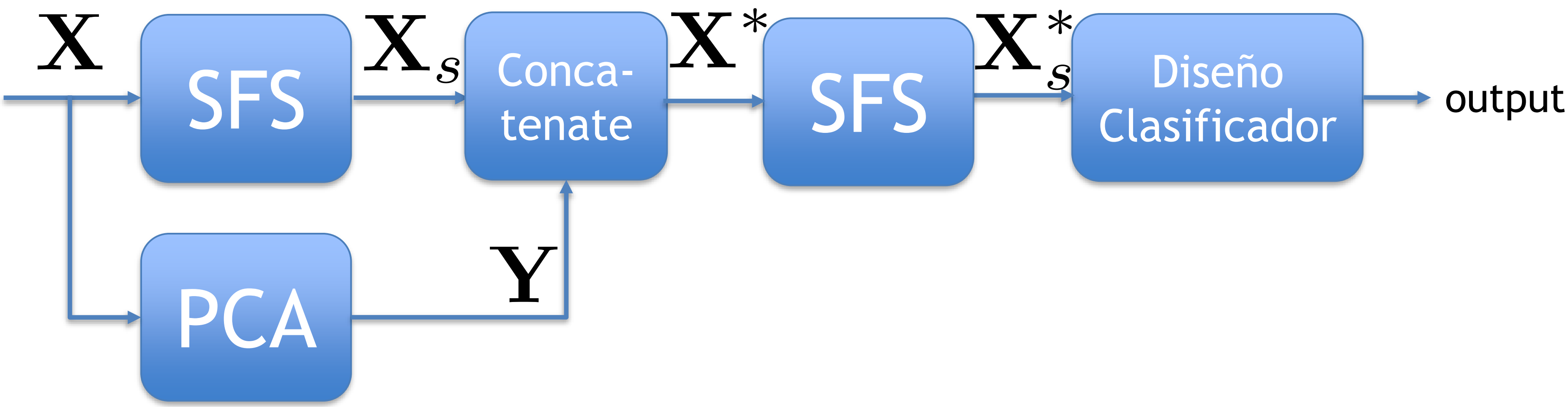
Nuevas características N x L
(N muestras y L nuevas características)
Se escogen las p primeras (las componentes principales)

Estrategia con PCA y SFS (1/3):

Estrategia con PCA y SFS (2/3):



Estrategia con PCA y SFS (3/3):



OTRAS TRASNFORMACIONES

ICA
(Independent Component Analysis)

Diferencia de ICA con PCA:

- PCA elimina correlaciones pero no otro tipo de dependencia.
- ICA elimina correlaciones y dependencias de mayor orden.

- En PCA se persigue que la covarianza entre las variables transformadas sea 0

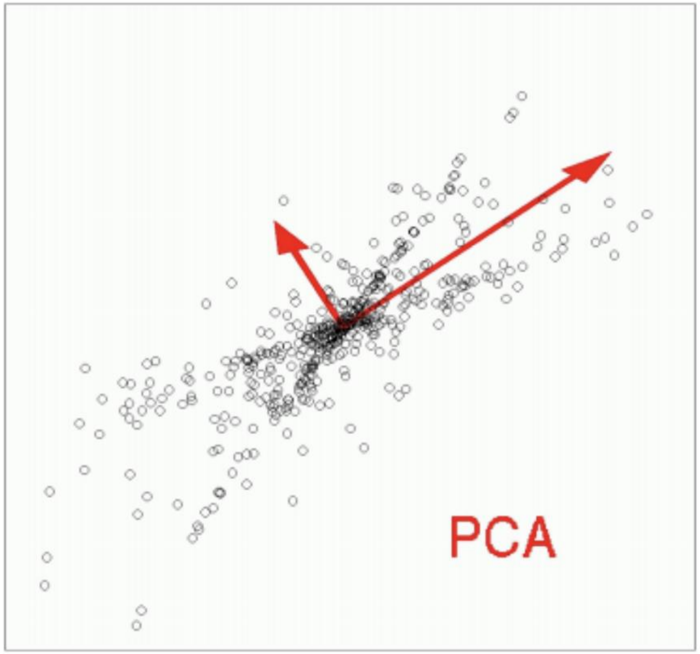
$$\mathrm{cov}(y_k, y_l) = 0$$

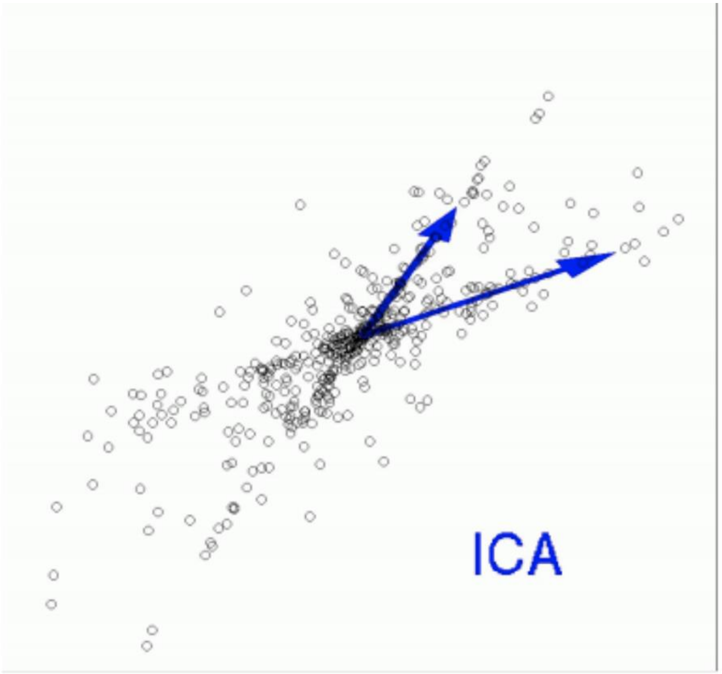
- En ICA se persigue que la variables sean independientes:

$$p(y_1, y_2, \cdots, y_L) = p(y_1)p(y_2)\cdots p(y_L)$$

Diferencia de ICA con PCA:

- En PCA los vectores son ortogonales.
- En ICA los vectores no son ortogonales.





© http://compneurosci.com/wiki/images/4/42/Intro_to_PCA_and_ICA.pdf

PLSR
(Partial Least Squares Regression)

Descomposición PLSR:

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{P}^{\mathsf{T}} + \mathbf{E}$$

$\mathbf{X}$: Matriz de características

$$\mathbf{Y} = \mathbf{U}\mathbf{Q}^{\mathsf{T}} + \mathbf{F}$$

$\mathbf{Y}$: Matriz de labels(*)

Las descomposiciones de $\mathbf{X}$ e $\mathbf{Y}$ se hacen con el fin de maximizar la covarianza entre $\mathbf{T}$ y $\mathbf{U}$.

Las matrices $\mathbf{P}$ y $\mathbf{Q}$ son ortogonales. Las matrices $\mathbf{E}$ y $\mathbf{F}$ corresponden al error.

La idea es buscar $\mathbf{T}$, que es la transformada de $\mathbf{X}$.

(*) Matriz binaria de N x K, $Y(i,k)$ = 1 if $y(i) = k$, con K número de clases